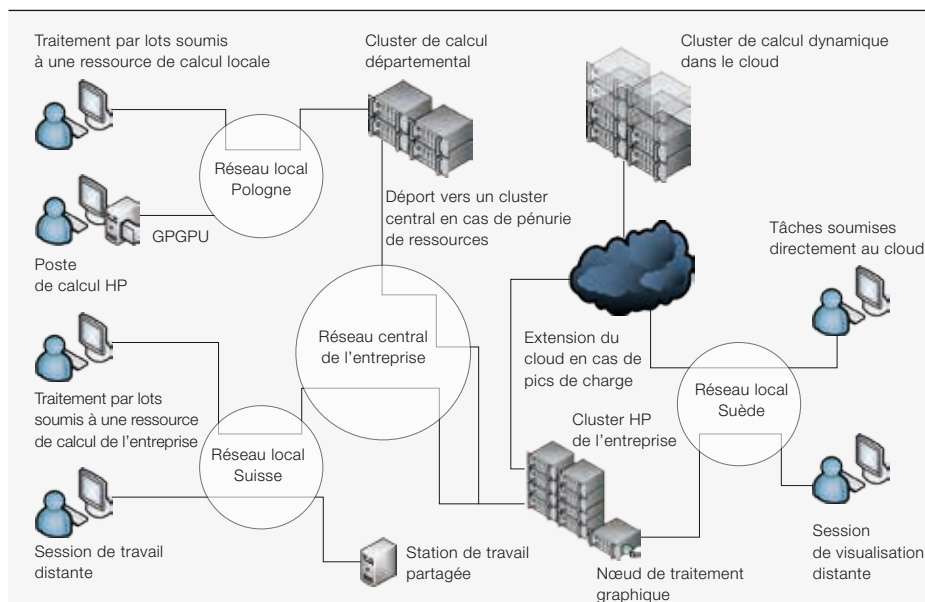




# Arrêt sur image

La simulation numérique au programme de l'industrie

BARTOSZ DOBRZELECKI, OLIVER FRITZ, PETER LOFGREN, JÖRG OSTROWSKI, OLA WIDLUND – L'une des grandes vertus de la simulation sur ordinateur est sa capacité à résoudre des problèmes industriels complexes pour concevoir mieux, plus vite et relativement moins cher. Le domaine continue d'évoluer avec les progrès du calcul scientifique, de l'architecture informatique et du traitement parallèle de l'information : beaucoup de logiciels de simulation mobilisent en effet des dizaines de « cœurs » pour résoudre des problèmes volumineux et complexes avec une précision accrue, dans des temps raisonnables. Les outils du commerce et ceux développés par ABB sont de plus en plus relayés par les logiciels libres (*open source*). Quelles infrastructures et technologies se cachent derrière ces avancées au service de l'industrie ?



Configuration actuelle et perspectives d'évolution

Souvent plus rapide, moins chère, plus précise et mieux pourvue en outils aptes à résoudre la complexité industrielle que le prototypage physique, la simulation est aujourd'hui au centre de l'innovation produit ABB. Décryptage.

### Un écosystème voué au calcul

Le calcul intensif, ou calcul « à haute performance » (HP), est l'arme stratégique de la simulation numérique. C'est pourquoi ABB a investi au fil des ans dans ses propres *clusters* (ordinateurs répartis) et dispose aujourd'hui en interne de ressources dédiées au calcul HP. Si ces lourds systèmes permettent de simuler les produits les plus complexes, ce ne sont pas les seuls outils au service des spécialistes du domaine.

La démocratisation du calcul scientifique et la révolution de l'informatique « multi-cœur » ont mis le parallélisme à la portée des bureaux d'études. Beaucoup de simulations sont aujourd'hui effectuées sur d'énormes postes ou « supercalculateurs ». Si cette technologie de rupture a semblé un temps s'imposer avec l'émergence des accélérateurs graphiques GPU (*Graphics Processing Unit*) dédiés au calcul HP, elle doit encore faire ses preuves sur le terrain industriel.

D'autres plates-formes de calcul intensif fleurissent avec le potentiel de remodeler l'infrastructure de simulation : ce sont les centres de données (*datacenters*) accessibles à un large public, en libre-service payé à l'usage, piliers de l'informatique externalisée dite « en nuage », ou *cloud computing*.

Pour autant, ces outils généralistes se prêtent mal à la charge de calcul des simulations qui nécessitent souvent des solutions réseau spécialisées à large bande passante et faible latence, même

« nuage » pourrait réduire de moitié le coût total de possession de l'infrastructure. Mais le cloud continue d'inquiéter les entreprises ; la principale interrogation concerne la sécurité. Il reste beaucoup à faire avant que les industriels et leurs clients confient leurs données à une infrastructure de stockage et de traitement délocalisée échappant à leur contrôle.

À court terme, un centre de calcul HP s'annonce comme la solution la plus performante et économique, qui pourrait

**Le calcul haute performance est l'arme stratégique de la simulation numérique. ABB a donc investi dans ses propres clusters.**

si certains hébergeurs de services *cloud* adaptent des parties de leurs *datacenters* aux exigences du calcul intensif. Les premières études comparatives d'offres *cloud* réalisées par ABB révèlent que les applications de traitement parallèle à mémoire distribuée et petit volume d'échanges offrent des performances satisfaisantes. D'après les projections de coûts basées sur des historiques d'usage extraits du système de calcul HP d'ABB, la migration de charges ciblées dans le

d'ailleurs s'enrichit de clusters plus petits, dans chaque service de l'entreprise. Le synoptique → 1 préfigure l'architecture matérielle de la simulation numérique : des stations de travail dopées par des processeurs graphiques de calculs génériques GPGPU (*General-Purpose GPU*) cohabiteront avec une configuration plus dynamique qui permettra de résorber les pics d'activité et le déficit de moyens internes en déportant une partie de la charge vers les postes de calcul de l'entreprise et en

#### Photo p. 22

La puissance de calcul ne cesse d'évoluer, tout comme les outils de simulation qui permettent de développer de nouveaux produits.

---

# L'explosion des datacenters publics est appelée à redessiner l'infrastructure de simulation.

sollicitant à la volée les ressources supplémentaires d'un cloud externe public.

Une fois l'infrastructure en place, il faut développer les bons processus pour garantir un emploi efficace des ressources matérielles et logicielles disponibles.

## Du bon usage des ressources

L'achat et la maintenance du matériel de calcul intensif reviennent d'habitude moins cher que l'acquisition d'une licence de logiciel de simulation. Bien dimensionner et exploiter ces ressources limitées obligent à arbitrer entre plusieurs facteurs : le nombre de processeurs à la tâche, la topologie matérielle (mémoire partagée ou distribuée), l'interconnexion du cluster (débit de transmission), le nombre de licences disponibles et la configuration des systèmes de file d'attente (pour maximiser le rendement des simulations par lot, par exemple, tout en préservant la disponibilité des licences pour une utilisation interactive le jour).

La pondération de ces facteurs varie selon le modèle de licence propre à l'éditeur de logiciels. D'ordinaire, chaque tâche est régie par une seule licence « simple cœur » onéreuse, alors que chaque processeur supplémentaire exploite une licence de calcul HP moins chère. Les éditeurs pratiquent en majorité des tarifs dégressifs, le coût de la licence diminuant en fonction de la quantité achetée. Cette politique de prix pousse à exécuter chaque simulation sur un maximum de processeurs en un minimum de temps, afin de rentabiliser les coûteuses licences simple cœur.

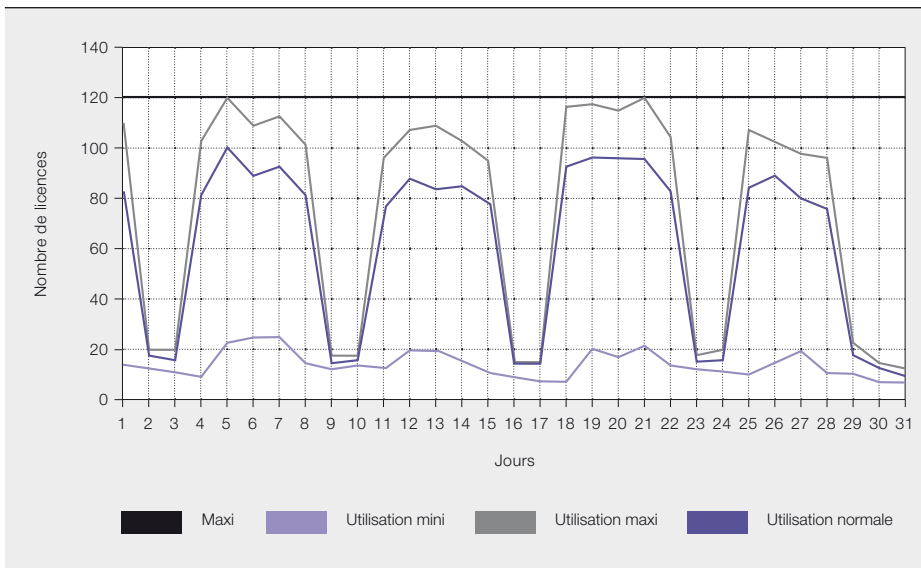
ABB a beaucoup fait ces huit dernières années pour coordonner et partager ses ressources matérielles et logicielles, d'abord de manière plutôt informelle avec quelques-unes des plus grandes équipes spécialistes de la simulation, et maintenant avec tous les services SI/TI du Groupe. L'objectif est double : prendre conscience des coûts mais aussi mutualiser avantageusement les ressources disponibles. Les équipes qui en font un

usage limité ou les nouveaux utilisateurs peuvent ainsi y avoir accès sur une courte période. De quoi simplifier l'essai et l'évaluation des outils de simulation, et limiter l'investissement de départ. Ce partage des matériels et licences logicielles entre branches d'activité et sites ABB est très important dans le cadre de projets avec transfert de technologies, surtout pour les centres de recherche du Groupe ; chacun peut très tôt accéder aux outils et modèles développés. La plupart des éditeurs de logiciels y a aussi vu son intérêt : faciliter l'accès des nouveaux utilisateurs à leurs produits permet notamment de mieux cerner les besoins de la clientèle. La démarche implique généralement des contrats groupés avec les éditeurs. L'intérêt est ici d'améliorer la visibilité d'ABB. Le Groupe détient aujourd'hui des contrats et des « *pools* de licences » mondiaux pour plusieurs grandes suites logicielles de simulation.

Un bon exemple de partage des ressources matérielles de calcul intensif est le nouveau cluster leo de Linux, hébergé par l'un des centres de recherche ABB et spécialisé dans les simulations complexes de mécanique des fluides et de dynamique moléculaire. Leo est cofinancé par deux centres de recherche ABB et utilisé par plusieurs équipes dans de nombreux pays. Un autre cluster, krak, est financé et géré par un troisième centre de recherche du Groupe, tout en cohabitant avec leo, pour des raisons pratiques. Krak réalise d'ailleurs les calculs de la plate-forme *Simulation Toolbox* d'ABB (cf. p. 16–21).

Ce partage ne va pas de soi. Certaines difficultés, d'ordre technique, se règlent facilement ; d'autres, relevant du logiciel, sont plus délicates :

- Modes de résolution des conflits ;
- Prise en compte des différents profils d'usage ;
- Affectation et répartition des coûts d'utilisation de nouvelles ressources en cas de pénurie ;
- Interprétation des statistiques de licences.



eLicense fournit de précieuses données aux processus d'achat des licences d'exploitation.

Comme pour le partage de logiciels, la réussite de la solution passe par la mise en œuvre d'une méthode rigoureuse d'administration du pool de licences : définition de politiques et règles communes d'utilisation, anticipation de problèmes potentiels, proposition de solutions. Cela peut se traduire par des conférences téléphoniques avec des représentants de toutes les équipes contribuant au pool, mais aussi par une petite équipe chargée de régler les problèmes au quotidien. Dans un souci d'équité et de conciliation en cas de conflit, il est fondamental de recueillir et de suivre les statistiques d'usage, et d'en informer tous les utilisateurs. C'est dans cette optique qu'ABB a développé son outil de gestion sur le Web eLicense → 2.

### Modèles physiques, méthodes numériques

Le point de départ de toute simulation est un modèle mathématique qui décrit les phénomènes physiques du processus étudié. Une fois ce modèle élaboré, un algorithme numérique de calcul peut être mis en œuvre.

Ces deux outils sont aussi importants que l'ordinateur lui-même. Impossible, par exemple, de mesurer le champ électromagnétique dans un transformateur à l'aide d'un modèle atomique, même avec le plus rapide des supercalculateurs ; l'appareil comporte bien trop d'atomes ! À la place, on construit un modèle en moyennant le comportement

des atomes et des électrons pour en déduire les propriétés du matériau. Cette description, couplée aux équations fondamentales de l'électromagnétisme (Maxwell), débouche sur un modèle adapté à la simulation des champs électromagnétiques dans un transformateur.

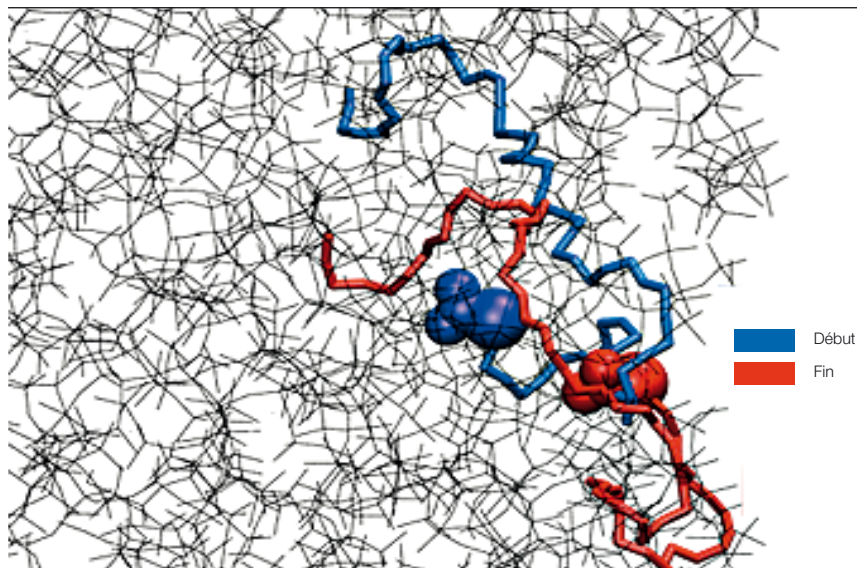
Mais ce n'est pas tout. Après avoir choisi un modèle adéquat offrant un bon niveau de simplification, il faut « dire » à l'ordinateur comment le calculer, ce qui revient à sélectionner et à implanter un algorithme de résolution des équations mathématiques constituant le modèle physique : c'est l'« approche numérique », dont la méthode des éléments finis (MEF) est un exemple. Elle est garante de la précision, de la rapidité et de la robustesse du calcul. Une bonne méthode dépend donc du problème étudié et d'une judicieuse combinaison de modèle physique, d'algorithme numérique et de matériel.

Les problèmes de mécanique des structures, de dynamique des fluides et de calcul de champ électromagnétique sont le lot habituel des simulations numériques en ingénierie. Les codes commerciaux ou libres donnent souvent satisfaction. Par contre, les simulations de processus spécifiques requièrent le développement de méthodes de calcul propres à l'entreprise, aux trois niveaux précités : modélisation, algorithmique, matériel.

ABB a beaucoup fait ces huit dernières années pour coordonner et partager ses moyens matériels et logiciels.

Les ingénieurs ABB emploient les outils les plus performants et les modèles les plus puissants pour concevoir les meilleurs produits.

### 3 Simulation de dynamique moléculaire



Orientation initiale et finale d'une molécule chargée près de la surface d'un isolant PDMS ; en configuration finale, le groupe chargé pénètre plus profondément dans la masse.

Les propriétés de matériaux ou géométries spéciales compliquent la tâche. Pour cela, le calcul multiphysique, qui résout de front les équations de plusieurs paramètres physiques, suscite un intérêt croissant qui a d'ailleurs amené les fournisseurs à intégrer le «multiphysique couplé» à leurs logiciels, surtout pour les principales combinaisons de phénomènes physiques rencontrées dans l'industrie, comme les interactions fluide-structure. Pour d'autres, notamment les processus d'arc mêlant dynamique des fluides et électromagnétisme dans les produits ABB, il n'y a guère de solutions «sur étagère» efficaces... ni même de solutions du tout.

Les domaines classiques ayant recours aux méthodes basées sur le maillage, comme la MEF, coexistent aujourd'hui avec des méthodes de calcul et des modèles physiques destinés aux processus moléculaires ou atomiques, dont les plus connus sont la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT (*Density Functional Theory*) et la dynamique moléculaire. Même si ces outils de haut vol ne devraient pas occuper une place aussi importante chez ABB que dans l'industrie pharmaceutique, l'ambition est de les appliquer à la résolution des grandes interrogations de la science des matériaux. L'isolation des réseaux en courant alternatif et continu à haute tension (HT), notamment, en tire aujourd'hui parti pour donner une vue plus «microscopique» du transport électrique et

d'autres processus dynamiques. Une application concrète de la dynamique moléculaire a récemment été développée en collaboration avec la recherche IBM : le calcul de la diffusion des molécules légères du PDMS (polymère organosiloxane de la famille des siloxanes) a permis d'expliquer une nette reconstitution de l'hydrophobicité en surface du matériau, cruciale pour la stabilité et la longévité de l'isolation des câbles d'extérieur HT. On a ainsi pu simuler l'orientation et la polarisation des molécules → 3 avec des groupes méthyles à la surface de l'isolant. Le phénomène explique la perte d'hydrophobicité superficielle en cas d'oxydation mais aussi le rétablissement de cette propriété par une interaction particulière des molécules de cyclométhicone (famille des silicones), des groupes méthyles oxydés et des ions Na+.

#### ABB trace la voie

Si l'informatique en nuage (*cloud computing*) et le calcul GPU tardent à percer dans le domaine de la simulation numérique, la parallélisation sur machines multicœurs fédérées en clusters y joue déjà un rôle décisif.

Pour les différentes équipes d'une entreprise, le partage des matériels et logiciels est un moyen facile et économique d'accéder aux dernières ressources technologiques et matérielles de la simulation. Cela se concrétise chez ABB par un échange efficace des résultats

de la recherche-développement et des meilleures pratiques entre ses centres de recherche et ses divisions opérationnelles.

Les études de marché sont unanimes : les groupes industriels qui sortent du lot associent inmanquablement la simulation numérique avancée à leur développement produit. ABB emploie les méthodes et les modèles les plus performants pour doter ses clients des meilleurs produits. Pour ce qui est de la simulation adaptée aux besoins du Groupe, inutile de réinventer la roue ! Les outils sont là. Ce qui n'empêchera pas nos scientifiques d'ouvrir de nouvelles pistes d'innovation partout où la technologie ABB prédomine.

#### Bartosz Dobrzelecki

ABB Corporate Research  
Cracovie (Pologne)  
bartosz.dobrzelecki@pl.abb.com

#### Oliver Fritz

Jörg Ostrowski  
ABB Corporate Research  
Baden-Dättwil (Suisse)  
oliver.fritz@ch.abb.com  
joerg.ostrowski@ch.abb.com

#### Peter Lofgren

Ola Widlund  
ABB Corporate Research  
Västerås (Suède)  
peter.lofgren@se.abb.com  
ola.widlund@se.abb.com